結晶構造の体系的分類

琉球大・理　細谷将彦*

§1. はじめに

自然科学における分類法で最も完備したものは生物学のそれであろう。全ての生物は門・綱・目・科・属・種のカテゴリーによって一義的に分類される。これと比較すれば，結晶構造の従来の分類法は全て不備なものである。生物学に範をとり，次のような条件を満たす結晶構造の分類法を確立すべきであろう。

① 分類の基準が明確であって結果が一義的であること。即ち類似した2つの結晶構造を同種とみるか異とみるかの弁別法が判然としていること。

② 分類の基準が全ての結晶構造に対して適用できること。

③ 分類が体系的であり，分類上の位置の遠近が結晶構造の類似性の遠近に対応すること。即ち，例えば同一科に属する生物同士は同一目に属して科のちがう生物同士よりも近縁であるが，それと同様の関係が成立すること。

更に生物とちがって結晶構造は本来数学的な対象であるから，次の条件も満たすべきである。

④ 数学的に可能な全ての結晶構造を数え上げることのできる分類法であること。即ち，あるカテゴリーを定めると，それよりも下位のカテゴリーは数え上げることができなければならない。

この論文の目的は上記の4つの条件を全て満たす分類法が存在することを示す点にある。生物の分類が体系的であるのは，その背後に進化の系統樹をかくしているからである。結晶構造の場合もそれにあたるものを考えることができる。即ち類似した結晶構造はある共通の原型構造から変形してできたものとみなし，この変形の系列に基いて分類するのである。同様の考えは相津によって結晶の相転移等に適用され，多くの有用な結果を生んだ。[1~5] ただし，そこで用いられたのは通常の点群や空間群なので，結晶構造そのものの分類には不十分である。筆者は新しい群を定義することにより，同様の考えでブラヴェ格子の14種が導けることを示した。[6] 今回はこの群を一般化し，全ての結晶構造に対して適用できるように拡大したものを用いる。

---

*) Hosoya Masahiko

以上の通り，今回の分類法は真に体系的なものであって，その結果今まであまり明らかでなかった異なる結晶構造間の遠近関係がわかるようになり，また結晶構造の変化を考える際に可能な型を全て尽すことなどができるようになる。

§ 2. 結晶構造の種と属

まず最初に考えるべきことは結晶構造の指定のしかたである。結晶構造は単位胞の形と大きさ，及びその中の原子の座標によって指定することができる。しかし，ここでは後に述べる群の対称操作の都合上，次のような指定のしかたをする。全ての結晶はそのブラヴェ格子と一致する副格子に分けることができる。このようにして得られた副格子を基本副格子と言うことにする。例えばNaCl構造はNaとClそれぞれの面心立方格子が基本副格子である。しかしルチル（ TiO_2 ）構造はTi 1個とO 2個の副格子ではだめで， Ti 2個， O 4個それぞれの単純正方格子にまで分解してはじめて基本副格子となる。前の論文[6] で示したように，1個のブラヴェ格子は基本四面体によって指定できる。基本四面体とは格子点に頂点を持ち，内部には格子点を含まない四面体を言う。すると一般の結晶は一つの基本副格子の基本四面体に他の基本副格子から1格子点ずつを頂点として付け足して，多面体を与えればよい。このような多面体を基本多面体と呼び，これによって結晶構造を指定する。

結晶が与えられても基本多面体のとり方は無数にある。ブラヴェ格子の場合と同様に，これらの基本多面体間の相互の変換は無限群を作る。基本多面体は特別な形をとるとき，それらの変換のうちのいくつかに対して不変である。そのような変換は有限群を作る。これらの有限群は無限個あるが，後に述べるように共役なものは同じとみなせば有限個となり，結晶構造を分類するために好都合な対象となる。ゆえにこれらの群を結晶構造分類の最小の要素とし，生物学にならって種と呼ぶ。従って今回の分類は結晶構造そのものよりもむしろその構造に対応する群の分類である。しかしもちろん結晶構造そのものや基本多面体も対応する種の名称で呼んでよい。

基本多面体の連続的な変形によって，ある種から別の種への転移が起こりうることは明らかである。しかし基本多面体の面の数がちがったり，各頂点の原子の種類がちがったりする種へは一般には転移できない。従って基本多面体の各頂点を構成する原子の種類と数とによって，種の上位の分類ができる。これを属と呼ぶことにする。属を指定するには基本副格子の原子の種類と数による一種の化学式を与えばよい。これは一原始胞の中の全ての原子の種類と数による一種の化学式を与えればよい。これは一原始胞の中の全ての原子が一分子を作るとしたときの分子式にあたる。ただし元素の種類には今は興味がなく，単に互いに異なるものを区別する

だけでよいから，アルファベットをA，B，C順に原子に割り当て，かつ添字がA，B，C順に増えてゆくようにする。例えばNaC1やCsC1構造AB属，ウルツ鉱構造はA_2B_2属，ルチル構造はA_2B_4属である。

基本多面体間相互の変換による無限群は1つの属に1個ずつ存在する。同一の属に属する種は全てこの無限群の有限部分群として導けるので，この無限群を属原型群と呼ぶことにする。

属原型群の操作を明確にするために基本多面体の各頂点は次のようにとる。即ち$A_\alpha B_\beta C_\gamma\cdots$属の場合，最初の基本四面体はA原子の副格子から作り，各頂点に1，2，3，4の番号を任意につける。第5の頂点は別のA副格子から，第6の頂点はまた別のA格子から，……という具合にとり，Aの副格子が尽きたらBの副格子から同様に頂点をとり，以下C，D，……と進む。i番目の頂点とj番目の頂点を結ぶ線分の長さをlijとする。$(lij)^2$の全てを成分とする$(n+2)(n+3)/2$次元ベクトル（ただしnは基本副格子の数，即ち$n=\alpha+\beta+\gamma+\cdots\cdots$）で基本多面体を表わせば属原型群の操作はこのベクトルにかかる行列で表わせる。（前の論文[6]では$(lij)^2$でなくlijを成分としたので行列では表わせなかった。）ベクトル成分$(lij)^2$の順序は$i<j$として，jの小さい順とし，jが同じならiの小さい順とする。属原型群の要素は最初のA副格子内での基本四面体の変換と同じ原子の副格子間での頂点の交換である。

ブラヴェ格子の場合と同様，種の群（P，Q，R,……）はそれと共役な群（$X^{-1}PX$，$X^{-1}QX$，$X^{-1}RX$,……）とは同じ種である。ただしここでXは属原型群に含まれる要素だけでなく，その属の化学式で添字が等しい原子同士をそっくり交換する操作でもよい。後者の操作は例えば$A_2B_2C_2$属ならばAの副格子2個とBの副格子2個をそっくり交換する操作である。

種の名称は以下の三つの記号を「・」をはさんで順に並べたものとする。

① その種の基本多面体に許される自由度の数。

② その種の結晶構造の空間群の国際記号。

③ ①と②が全く同じでしかも種としては異なるものを区別するための番号。

③は①と②のみで他と区別がつくときはつけない。またこの番号の付け方には規則を作るのが難しいので，最初に分類を行なった者が自由に付けることとする。なお，この名称の他に既に慣習的な名称のあるものはそれも別名として許すことにする。 例えばNaC1種とかNsC1種と呼んでもよい。

分類の一義性を保つためには属原型群に対して次の制限を加えなければならない。それは属$A_\alpha B_\beta C_\gamma\cdots\cdots$の添字$\alpha$，$\beta$，$\gamma\cdots\cdots$が1以外の共通因数$m$を持ち，（$A'_\alpha$，$B'_\beta$，$C'_\gamma$，……）$m$と書けるときに必要となる。このようなときは基本多面体間の変換のうち属原型群の要素にしてはいけないものがある。それはその変換に対して不変な基本多面体から結晶構造を作ると実

は A_α，B_β，C_γ，……属になってしまうものである。もしこれらの要素を含めたならば $A_\alpha B_\beta C_\gamma$……属の種の中に $A_{\alpha'}$，$B_{\beta'}$，$C_{\gamma'}$，……の種と重複するものが現われてしまうのである。例えば A_2 属の場合，図1の基本六面体（12345）から（1′ 2′ 3′ 4′ 5）への変換は属原型群に入れてはいけない。それはこの変換に対して基本六面体が不変であるならば格子点5は格子点1と1′を結ぶ線分の中点にあることになり，この結晶は A_2 属でなく，A属になってしまうからである。

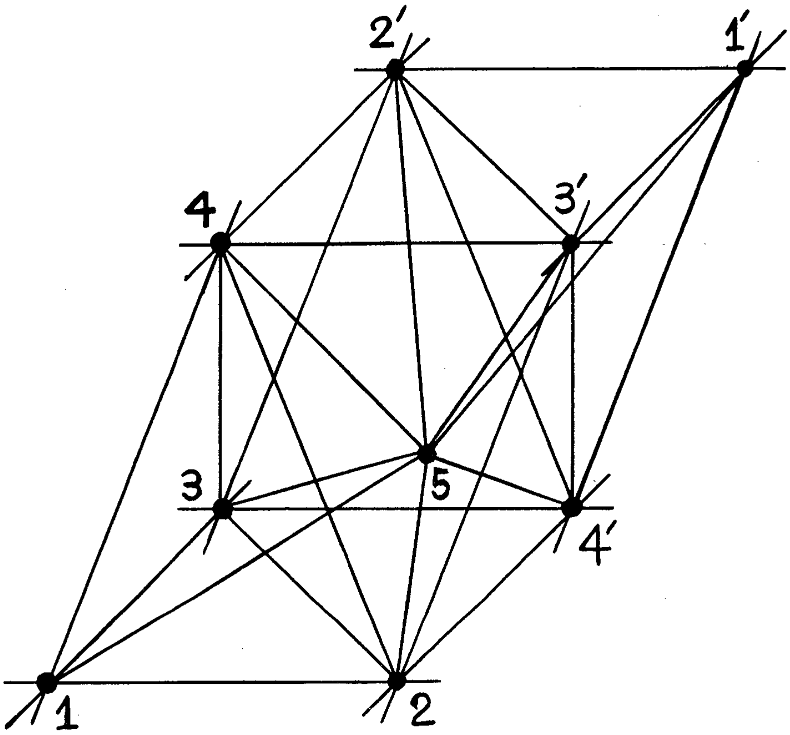


図　1.　A_2属の属原型群に入れてはならない変換：基本六面体（12345）から（1′2′3′4′5）への変換。

§ 3.　実例：AB属の分類

具体的な種の決め方の実例を示す。最も単純な属はA属であるが，これは前の論文で示したようにブラヴェ格子の14種になるので，ここでは次に単純なAB属を分類してみる。

AB属の結晶は基本六面体で与えられ，ベクトル（ℓ_{12}^2, ℓ_{13}^2, ℓ_{23}^2, ℓ_{14}^2, ℓ_{24}^2, ℓ_{34}^2, ℓ_{15}^2, ℓ_{25}^2, ℓ_{35}^2, ℓ_{45}^2,）で指定される。属原型群の操作は10行10列の行列で表わされる。それらのうち生成要素を次に示す。ただし，紙面の節約のため，これらの行列をもとのベクトルにかけた結果のベクトルで示す。

S_6:（ ℓ_{13}^2, ℓ_{14}^2, ℓ_{34}^2, ℓ_{12}^2, ℓ_{23}^2, ℓ_{24}^2,

$2\ell_{12}^2+2\ell_{13}^2+2\ell_{14}^2-\ell_{23}^2-\ell_{24}^2-\ell_{34}^2-2\ell_{15}^2+\ell_{25}^2+\ell_{35}^2+\ell_{45}^2$,

$\ell_{12}^2+\ell_{14}^2-\ell_{24}^2+\ell_{25}^2+\ell_{45}^2-\ell_{15}^2$, $\ell_{12}^2+\ell_{13}^2-\ell_{23}^2+\ell_{25}^2+\ell_{35}^2-\ell_{15}^2$,

$\ell_{13}^2+\ell_{14}^2-\ell_{34}^2+\ell_{35}^2+\ell_{45}^2-\ell_{15}^2$ ）

C_4:（ ℓ_{13}^2, ℓ_{34}^2, ℓ_{14}^2, ℓ_{23}^2, ℓ_{12}^2, ℓ_{24}^2, $\ell_{34}^2+\ell_{23}^2-\ell_{24}^2+\ell_{25}^2+\ell_{45}^2-\ell_{35}^2$,

$\ell_{12}^2+\ell_{14}^2-\ell_{24}^2+\ell_{25}^2+\ell_{45}^2-\ell_{15}^2$, ℓ_{25}^2, ℓ_{45}^2 ）

m: $(\ l_{13}^2,\ l_{12}^2,\ l_{23}^2,\ l_{14}^2,\ l_{34}^2,\ l_{24}^2,\ l_{15}^2,\ l_{35}^2,\ l_{25}^2,\ l_{45}^2\ )$

C_4': $(\ l_{13}^2,\ l_{12}^2,\ 2l_{12}^2+2l_{13}^2-l_{23}^2,\ l_{14}^2,\ 2l_{13}^2+2l_{14}^2-l_{34}^2,\ l_{24}^2,\ l_{35}^2,\ l_{15}^2,$

$l_{12}^2+l_{13}^2-l_{23}^2+l_{25}^2+l_{35}^2-l_{15}^2,\ l_{13}^2+l_{14}^2-l_{34}^2+l_{35}^2+l_{45}^2-l_{15}^2\ )$

S_4: $(\ l_{24}^2,\ l_{12}^2,\ l_{14}^2,\ l_{23}^2,\ l_{34}^2,\ l_{13}^2,\ l_{25}^2,\ l_{45}^2,\ l_{15}^2,\ l_{35}^2\ )$

m': $(\ l_{12}^2,\ l_{13}^2,\ l_{23}^2,\ l_{14}^2,\ 2l_{12}^2+2l_{14}^2-l_{24}^2,$

$2l_{13}^2+2l_{14}^2-l_{34}^2,\ l_{15}^2,\ l_{25}^2,\ l_{35}^2,\ 2l_{14}^2+2l_{15}^2-l_{45}^2\ )$

C_6: $(\ 2l_{12}^2+2l_{13}^2-l_{23}^2,\ l_{12}^2,\ l_{13}^2,\ l_{14}^2,\ l_{13}^2+l_{14}^2-l_{12}^2+l_{23}^2+l_{24}^2-l_{34}^2,\ l_{24}^2,\ l_{15}^2,$

$2l_{25}^2+2l_{23}^2-l_{35}^2,\ l_{25}^2,\ l_{45}^2\ )$

C_3: $(\ l_{13}^2,\ l_{23}^2,\ l_{12}^2,\ l_{14}^2,\ 2l_{13}^2+2l_{14}^2-l_{34}^2,\ l_{13}^2+l_{14}^2-l_{12}^2+l_{24}^2+l_{23}^2-l_{34}^2,\ l_{35}^2,\ l_{15}^2,\ l_{25}^2,$

$l_{13}^2+l_{14}^2-l_{34}^2+l_{35}^2+l_{45}^2-l_{25}^2\ )$

C_4'': $(\ l_{13}^2,\ l_{12}^2,\ 2l_{12}^2+2l_{13}^2-l_{23}^2,\ l_{14}^2,\ 2l_{13}^2+2l_{14}^2-l_{34}^2,\ l_{24}^2,\ l_{15}^2,\ 2l_{13}^2+2l_{15}^2-l_{35}^2,$

$l_{25}^2,\ l_{45}^2\ )$

結局AB属は表1の51種に分類される。これら51種の結晶構造を図2に示す。慣習的単位胞1個ずつを描いてある。

さてAB属の種は部分群と包含群の関係で図3のように互いに結ばれている。(包含群とはsupergroupの訳語で，AがBの部分群のとき，BはAの包含群であるという。) ここで直接結ばれている2つの群は右の群が左の群の極大部分群となっている。即ち両者の中間に包含群の関係で入りこむ他の群はない。このようにつながれた図を属の階層図と呼ぶことにする。

§ 4. 胞遷移と結晶構造の科

結晶内の原子の位置の微小な変化により，原始胞の大きさが急に変わることは相転移の研究でよく知られている。例えば体心立方格子で体心の原子が体心からわずかに変化すればたちまち原始胞の大きさは2倍になる。このような変化を胞遷移と呼ぼう。

胞遷移が起こると基本副格子の数が変わるので，結晶は種が変わるだけでなく属も変わってしまう。属が変われば基本多面体が変わり，属原型群の要素も全く変わってしまうので，これまでに述べた範囲内では胞遷移の前後の結晶構造間には何らの関係づけもなされない。しかし，異なる属同士であっても，胞遷移によって移り合えるものは，そうでないものに比べてより近縁であることは明らかである。そこで属の上に科と呼ぶ分類のカテゴリーを設け，胞遷移で移

表 1. AB属の種。（その1）

種 （別名）	対応する群の生成要素	位数	A原子の慣習的単位胞における B原子の位置
1・Fm3m（NaCl）	S_6, C_4, m	48	$(\frac{1}{2}, 0, 0)$
1・Pm3m（CsCl）	S_6, C_4', m	48	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$
1・F$\overline{4}$3m（せん亜鉛鉱）	$(S_6)^2$, S_4, m	24	$(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$
2・P6/mmm	C_6, m, $(C_4')^2 \cdot (S_6)^3$	24	$(0, 0, \frac{1}{2})$
2・P$\overline{6}$m2・1（WC）	C_3, m, $(C_4')^2 \cdot (S_6)^3$	12	$(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2})$
2・P$\overline{6}$m2・2	C_3, m, m′	12	$(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, 0)$
2・R$\overline{3}$m	S_6, m	12	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$
2・I$\overline{4}$/mmm（マルテンサイト）	C_4, m, $(C_4)^2 \cdot (S_6)^3$	16	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$
2・P4/mmm・1	C_4', m, $(C_4')^2 \cdot (S_6)^3$	16	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$
2・P4/mmm・2	C_4', m, m′	16	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$
2・P4/mmm・3	C_4'', m, $(C_4')^2 \cdot (S_6)^3$	16	$(0, 0, \frac{1}{2})$
2・I$\overline{4}$m2	S_4, m	8	$(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{4})$
3・P6mm	C_6, m	12	$(0, 0, z)$
3・R3m	$(S_6)^2$, m	6	(x, x, x)
3・R3m1	C_3, m	6	$(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, z)$
3・I4mm	C_4, m	8	$(0, 0, z)$
3・P4mm・1	C_4', m	8	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z)$
3・P4mm・2	C_4'', m	8	$(0, 0, z)$
3・Immm	$(C_4)^2$, m, $(C_4)^2 \cdot (S_6)^3$	8	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$
3・Fmmm	$(C_4)^2$, $C_4 \cdot m$, $(C_4)^2 \cdot (S_6)^3$	8	$(\frac{1}{2}, 0, 0)$
3・Cmmm・1	$(C_4')^2$, m, $(C_4')^2 \cdot (S_6)^3$	8	$(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$
3・Cmmm・2	$(C_4'')^2$, m, $(C_4')^2 \cdot (S_6)^3$	8	$(0, 0, \frac{1}{2})$
3・Cmmm・3	$(C_4')^2$, m, m′	8	$(\frac{1}{2}, 0, 0)$

表 1. AB属の種。（その２）

種 （別名）	対応する群の 生成要素	位数	A原子の慣習的単位胞における B原子の位置
3・Pmmm・1	$(C_4')^2,\ C_4'\cdot m,\ (C_4')^2\cdot(S_6)^3$	8	$(\frac{1}{2},\ \frac{1}{2},\ \frac{1}{2})$
3・Pmmm・2	$(C_4')^2,\ C_4'\cdot m,\ m'$	8	$(\frac{1}{2},\ \frac{1}{2},\ 0)$
3・Pmmm・3	$(C_4'')^2,\ C_4''\cdot m,\ (C_4')^2\cdot(S_6)^3$	8	$(0,\ 0,\ \frac{1}{2})$
3・F222	$(S_4)^2,\ S_4\cdot m$	4	$(\frac{1}{4},\ \frac{1}{4},\ \frac{1}{4})$
4・Imm2・1	$(S_4)^2,\ m$	4	$(\frac{1}{2},\ 0,\ z)$
4・Imm2・2	$(C_4)^2,\ m$	4	$(0,\ 0,\ z)$
4・Fmm2	$(C_4)^2,\ C_4\cdot m$	4	$(0,\ 0,\ z)$
4・Amm2・1	$m,\ (C_4')^2\cdot(S_6)^3$	4	$(x,\ 0,\ \frac{1}{2})$
4・Amm2・2	$m,\ m'$	4	$(x,\ 0,\ 0)$
4・Cmm2・1	$m,\ (C_4')^2$	4	$(\frac{1}{2},\ 0,\ z)$
4・Cmm2・2	$m,\ (C_4'')^2$	4	$(0,\ 0,\ z)$
4・Pmm2・1	$(C_4')^2\cdot(S_6)^3,\ C_4''\cdot m$	4	$(\frac{1}{2},\ 0,\ z)$
4・Pmm2・2	$(C_4'')^2,\ C_4''\cdot m$	4	$(0,\ 0,\ z)$
4・Pmm2・3	$(C_4')^2,\ C_4'\cdot m$	4	$(\frac{1}{2},\ \frac{1}{2},\ z)$
4・B2/m・1	$m,\ m\cdot(S_6)^3$	4	$(\frac{1}{2},\ 0,\ 0)$
4・B2/m・2	$(C_4)^2,\ (C_4)^2\cdot(S_6)^3$	4	$(0,\ \frac{1}{2},\ 0)$
4・P2/m・1	$(C_4')^2,\ (C_4')^2\cdot(S_6)^3$	4	$(0,\ \frac{1}{2},\ \frac{1}{2})$
4・P2/m・2	$(C_4')^2,\ m'$	4	$(\frac{1}{2},\ \frac{1}{2},\ 0)$
4・P2/m・3	$(C_4'')^2,\ (C_4')^2\cdot(S_6)^3$	4	$(0,\ 0,\ \frac{1}{2})$
5・B2・1	$(S_4)^2$	2	$(\frac{1}{2},\ 0,\ z)$
5・B2・2	$(C_4)^2$	2	$(0,\ 0,\ z)$
5・P2・1	$(C_4')^2$	2	$(0,\ \frac{1}{2},\ z)$
5・P2・2	$(C_4'')^2$	2	$(0,\ 0,\ z)$

表　1.　　AB属の種。（その３）

種　（別名）	対応する群の 生成要素	位数	A原子の慣習的単位胞における B原子の位置
6・Bm	m	2	（ x, y, 0 ）
6・Pm・1	$(C_4')^2 \cdot (S_6)^3$	2	（ x, y, $\frac{1}{2}$ ）
6・Pm・2	m′	2	（ x, y, 0 ）
6・$P\bar{1}$	$(S_6)^3$	2	（ $\frac{1}{2}$, 0, $\frac{1}{2}$ ）
9・P1	E（恒等要素）	1	（ x, y, z ）

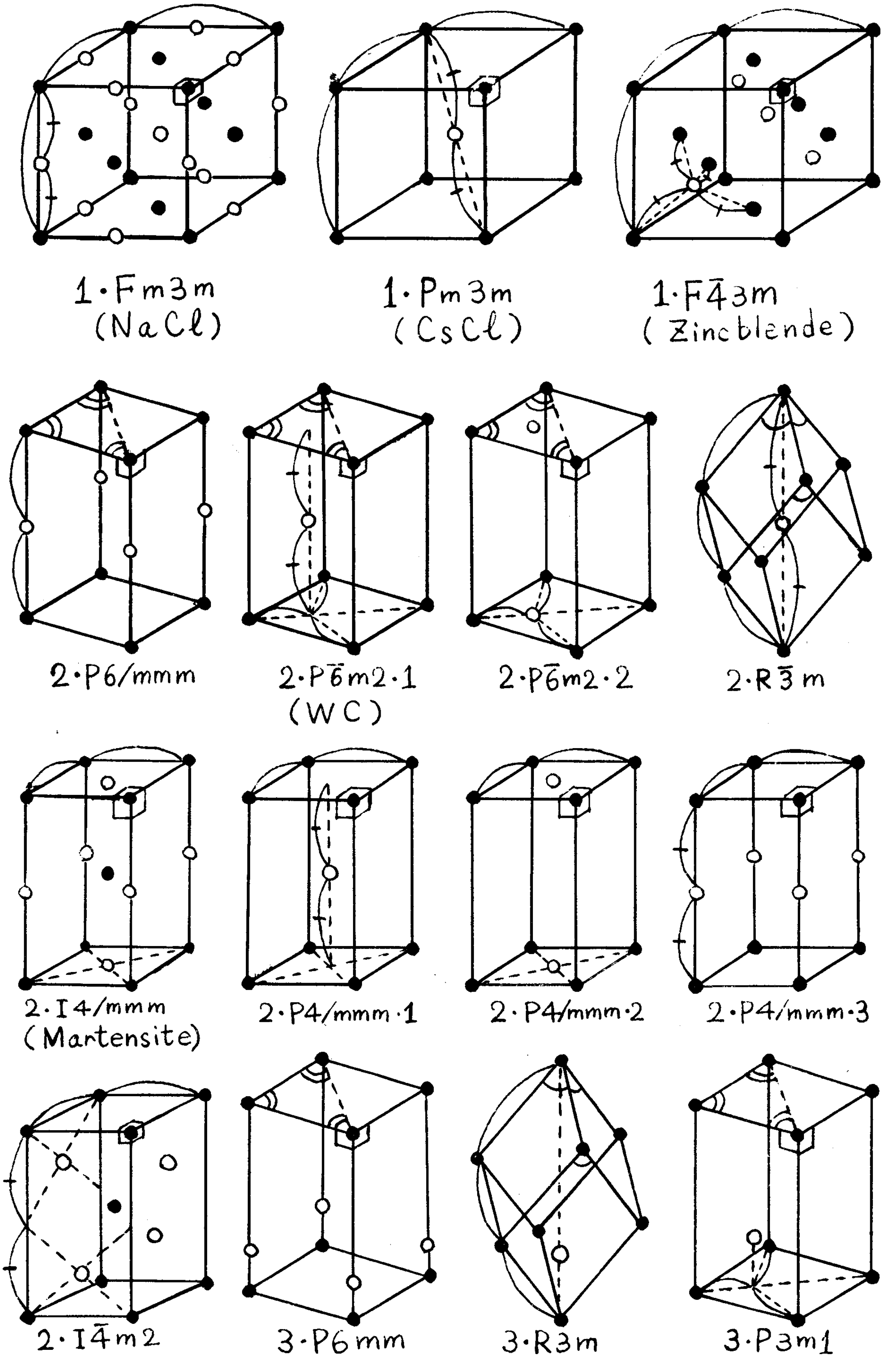

1·Fm3m
(NaCl)
1·Pm3m
(CsCl)
1·F$\bar{4}$3m
(Zincblende)
2·P6/mmm
2·P$\bar{6}$m2·1
(WC)
2·P$\bar{6}$m2·2
2·R$\bar{3}$m
2·I4/mmm
(Martensite)
2·P4/mmm·1
2·P4/mmm·2
2·P4/mmm·3
2·I$\bar{4}$m2
3·P6mm
3·R3m
3·P3m1

図　2.　　AB属の種。（その１）

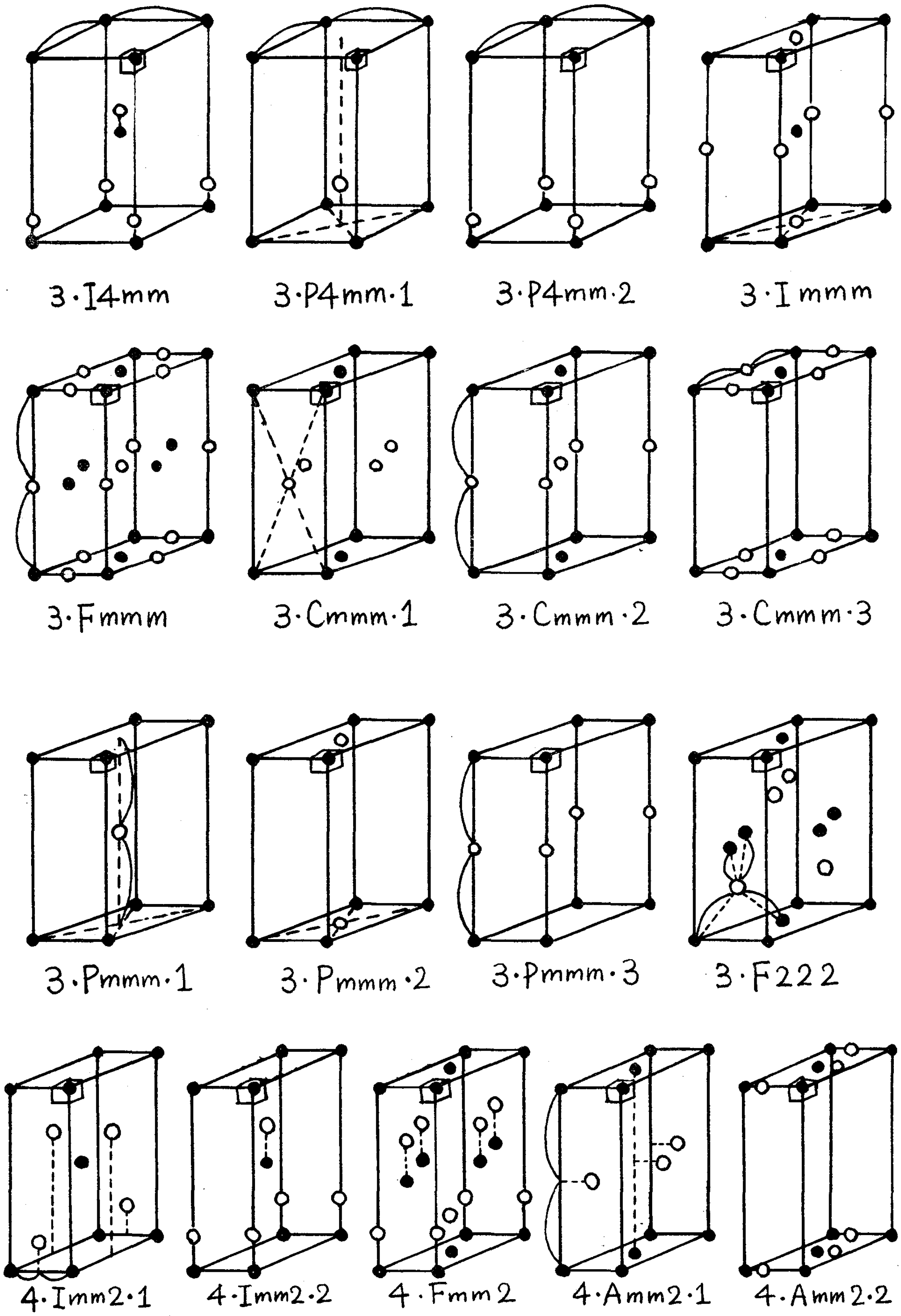

3・I4mm
3・P4mm・1
3・P4mm・2
3・Immm
3・Fmmm
3・Cmmm・1
3・Cmmm・2
3・Cmmm・3
3・Pmmm・1
3・Pmmm・2
3・Pmmm・3
3・F222
4・Imm2・1
4・Imm2・2
4・Fmm2
4・Amm2・1
4・Amm2・2

図　2.　　AB属の種。（その２）

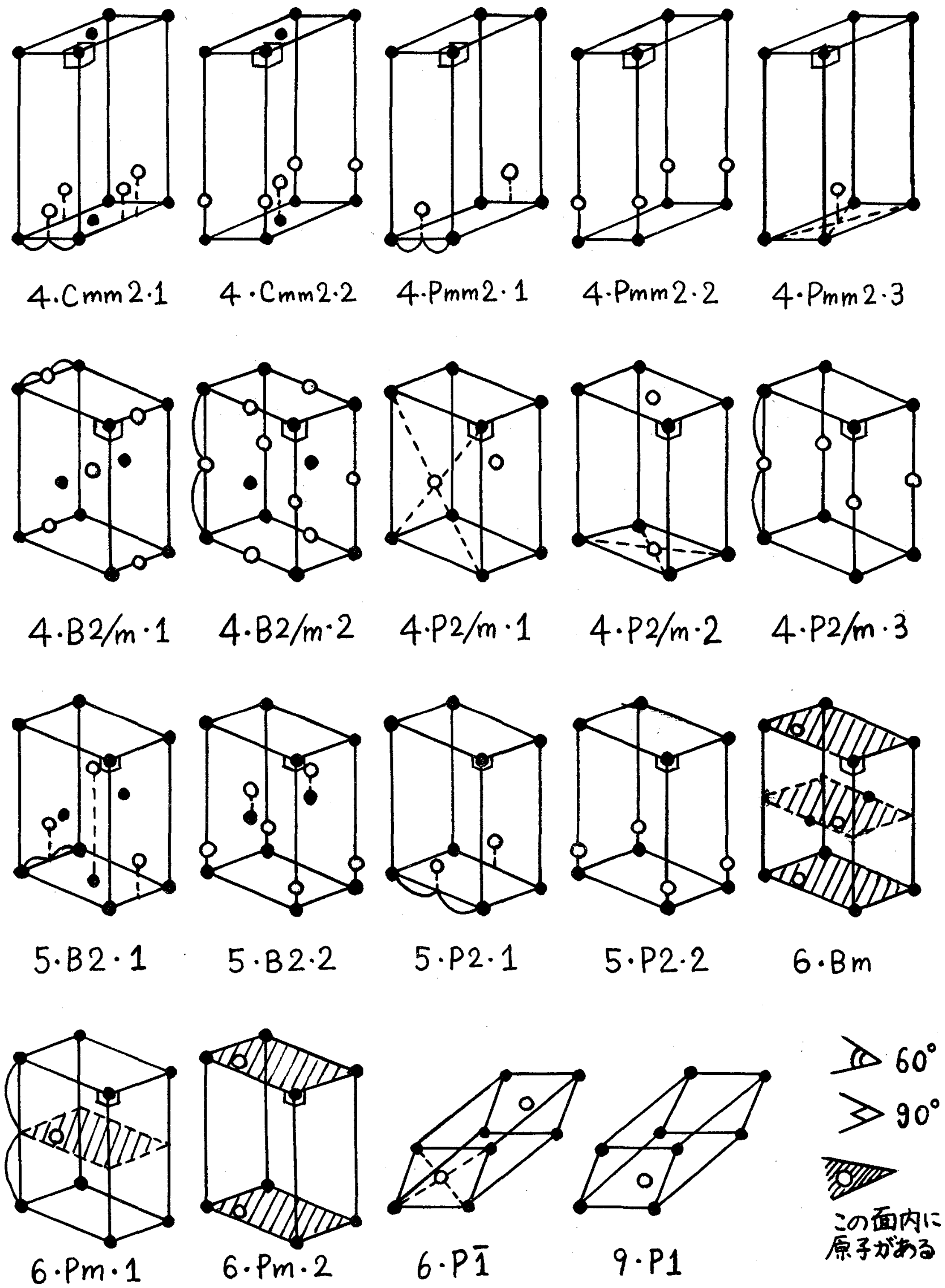

4·Cmm2·1
4·Cmm2·2
4·Pmm2·1
4·Pmm2·2
4·Pmm2·3
4·B2/m·1
4·B2/m·2
4·P2/m·1
4·P2/m·2
4·P2/m·3
5·B2·1
5·B2·2
5·P2·1
5·P2·2
6·Bm
6·Pm·1
6·Pm·2
6·P$\bar{1}$
9·P1
60°
90°
この面内に原子がある

図 2. AB属の種。(その3)

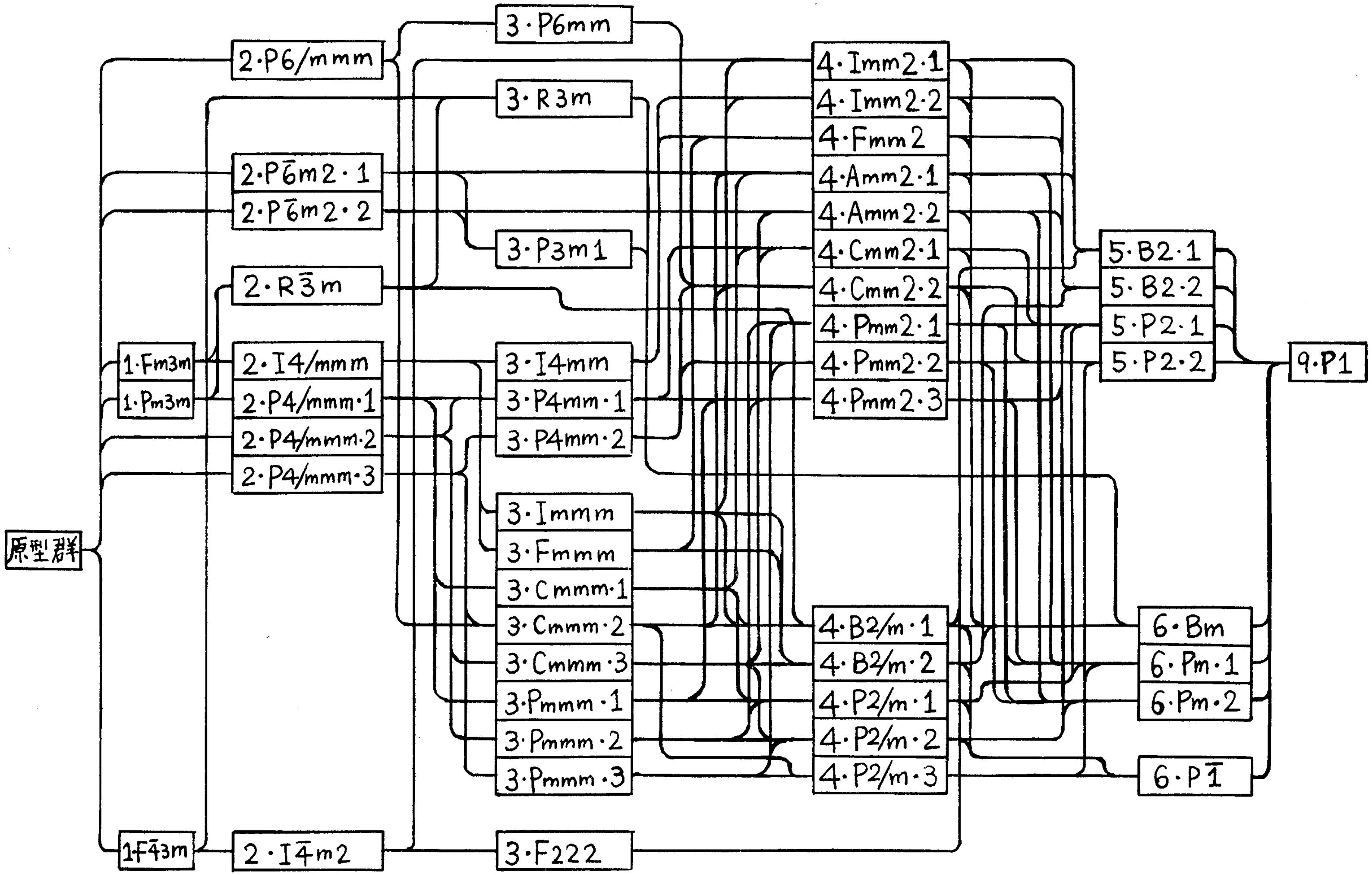


図 3. AB属階層図。線の枝分かれは丸みにそってのみ有効。

表 2. A_2属とAB属の対応。

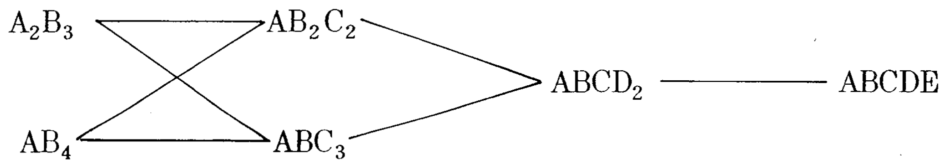
A_2 属	AB 属	A_2 属	AB 属
1・Fd3m (ダイヤモンド)	1・$F\bar{4}3m$ (せん亜鉛鉱)	4・Cmmm・1	4・Amm2・2
2・$P6_3/mmc$ (六方最密)	2・$P\bar{6}m2$・1 (WC)	4・Cmma	4・Cmm2・1
2・P6/mmm	2・$P\bar{6}m2$・2	4・Cmmm・2	4・Cmm2・2
2・$I4_1/amd$	2・$I\bar{4}m2$	4・Pmma	4・Pmm2・1
3・P6/mmm	3・P6mm	4・Pmmm	4・Pmm2・2
3・$R\bar{3}m$	3・R3m	4・Pmmn	4・Pmm2・3
3・$P\bar{3}m1$	3・P3m1	5・B2/b	5・B2・1
3・I4/mmm	3・I4mm	5・B2/m	5・B2・2
3・P4/nmm	3・P4mm・1	5・P2/b	5・P2・1
3・P4/mmm	3・P4mm・2	5・P2/m	5・P2・2
3・Fddd	3・F222	6・B2/m	6・Bm
4・Imma	4・Imm2・1	6・$P2_1/m$	6・Pm・1
4・Immm	4・Imm2・2	6・P2/m	6・Pm・2
4・Fmmm	4・Fmm2	9・$P\bar{1}$	9・P1
4・Cmcm	4・Amm2・1		

表 3. A属の種。

通常の名称	正式名称	通常の名称	正式名称
面心立方	1・Fm3m	体心直方	3・Immm
単純立方	1・Pm3m	面心直方	3・Fmmm
体心立方	1・Im3m	底心直方	3・Cmmm
六方	2・P6/mmm	単純直方	3・Pmmm
菱面体	2・$R\bar{3}m$	底心単斜	4・B2/m
単純正方	2・P4/mmm	単純単斜	4・P2/m
体心立方	2・I4/mmm	三斜	6・$P\bar{1}$

§ 5. 結晶構造の目

科の上に目をおくことにより結晶構造の分類は完成する。目は簡単に言えば構成原子の数が同じ科を一まとめにしたものである。ただし構成原子の数とは科の既約属の化学式の添字を全て足しあわせたものとし，これをそのまま目の名称とする。例えば AB_2 科と ABC 科はどちらも第３目に属する。同じ目に属する科の既約属の原型群の間には包含群－部分群の関係がある場合がある。例えば AB_2の原型群は ABC 属のそれの包含群である。 AB_2属原型群は ABC 属原型群に BとCを入れかえる操作を加えたものとなるからである。他の場合も同様に２つの原子を入れかえる操作を含むか含まないかによって，包含群－部分群の関係を次々と作ってゆくことができる。従ってそれぞれの目に対して科の既約属原型群の階層図を作れる。例えば第５目に対しては次のようになる。



これらの関係は現実の結晶構造の変化とは何ら対応せず，単に群としての関係を示すものである。

§ 6. まとめ

これまでの結果により，結晶構造は目・科・属・種の４つのカテゴリーで分類できる。例えば NaCl構造は第２目 AB 科 AB属 1・Fm3 m種である。 これら４段階のうち属が決まれば科と目は自明であるので，普通は属と種を言うだけでよい。

分数表の概要を表４に掲げる。

参 考 文 献

1) K. Aizu: Rev. mod. Phys. **34** (1962) 550.
2) K. Aizu: Phys. Rev. **146** (1966) 423.
3) K. Aizu: J. Phys. Soc. Japan **27** (1969) 387.
4) K. Aizu: Phys. Rev. **B2** (1970) 754.
5) K. Aizu: J. Phys. Soc. Japan (1979) 1716.
6) M. Hosoya: J. Phys. Soc. Japan (1979) 1691.

り合える属をまとめることにする。

今2つの属 $A_\alpha B_\beta C_\gamma$ ……と $A'_\alpha B'_\beta C'_\gamma$ ……とがあって($A_\alpha B_\beta C_\gamma$ ……)$_n$ = $A'_\alpha B'_\beta C'_\gamma$ ……(n は1以外の整数)であるとき，前者を後者の因数属，後者を前者の倍数属と呼ぼう。$A_\alpha B_\beta C_\gamma$ …の添字 α， β， γ，……に1以外の共通因数がないとき，この属を既約属と呼び，それ以外の属を可約属と呼ぼう。

さて，ある既約属とその全ての倍数属を集めたものを1つの科とし，既約属の名称をもってその科の名称とする。例えば最も単純な科はA科であってA， A_2， A_3，……の属を含む。次に単純な科はAB科であって，AB， A_2B_2， A_3B_3，……の属を含む。

因数属－倍数属の関係にある2つの属の結晶は胞遷移によって移り変わるので，両者の種の間にも関係がある。しかし属原型群がちがうので，包含群－部分群の関係を用いることができない。そこで集合としての関係を利用する。種はその群に対して不変な基本多面体の集合を決めている。1つの属内では2つの種が包含群－部分群の関係にあれば，それぞれの種の基本多面体の集合は逆に部分集合－包含集合の関係にある。(包含集合とは包含群に対応させて造った新語で，AがBの部分集合であるとき，BはAの包含集合であると言う。) 後者の関係は異った属の種の間に対しても拡張できる。因数属の基本多面体のとり方を倍数属のそれと同じにして比較すればよい。例えばA属と A_2 属の場合，A属の原始胞の大きさを2倍にして副格子2個から成るとみなせば，A_2 属と同様の基本六面体をとることができる。このように基本多面体を共通化すれば異なる属の種同士であっても包含集合－部分集合の関係を使って階層図を作れる。ただし属内の階層図と同様，2つの種が直接結ばれるのはそれらが包含集合－部分集合の関係にあり，しかもそれらの中間に同じ関係で入りこむ別の種がないときに限る。例として A_2 属とA属を接続した階層図を図4に示す。線でつながれている場合左側の種が右側の種の部分集合である。A_2 属の格子形はAB属の格子形のAとBの区別をなくしたものとして図2から得られるので，表2にAB属の種との対応を掲げる。またA属の種はよく知られたブラヴェ格子の14種であるが，通常の名称と今回の正式名称との対応を表3に掲げる。

二つの属が因数属－倍数属の関係にないときは共通因数属を媒介として間接的に関係づけることができる。例えば A_2 属と A_3 属は直接は結びつかないがA属を加えれば1つの階層図にまとめることができる。従って1つの科内の種の間の関係は必らず1つの階層図を作って調べることができる。構造変化で移り合える種は必らず同一の科内にあるから，どんな構造変化も必らず1つの階層図の中で考えることができる。階層図は生物の進化の系統樹に対応し，種の間の遠近関係を直接示すものである。

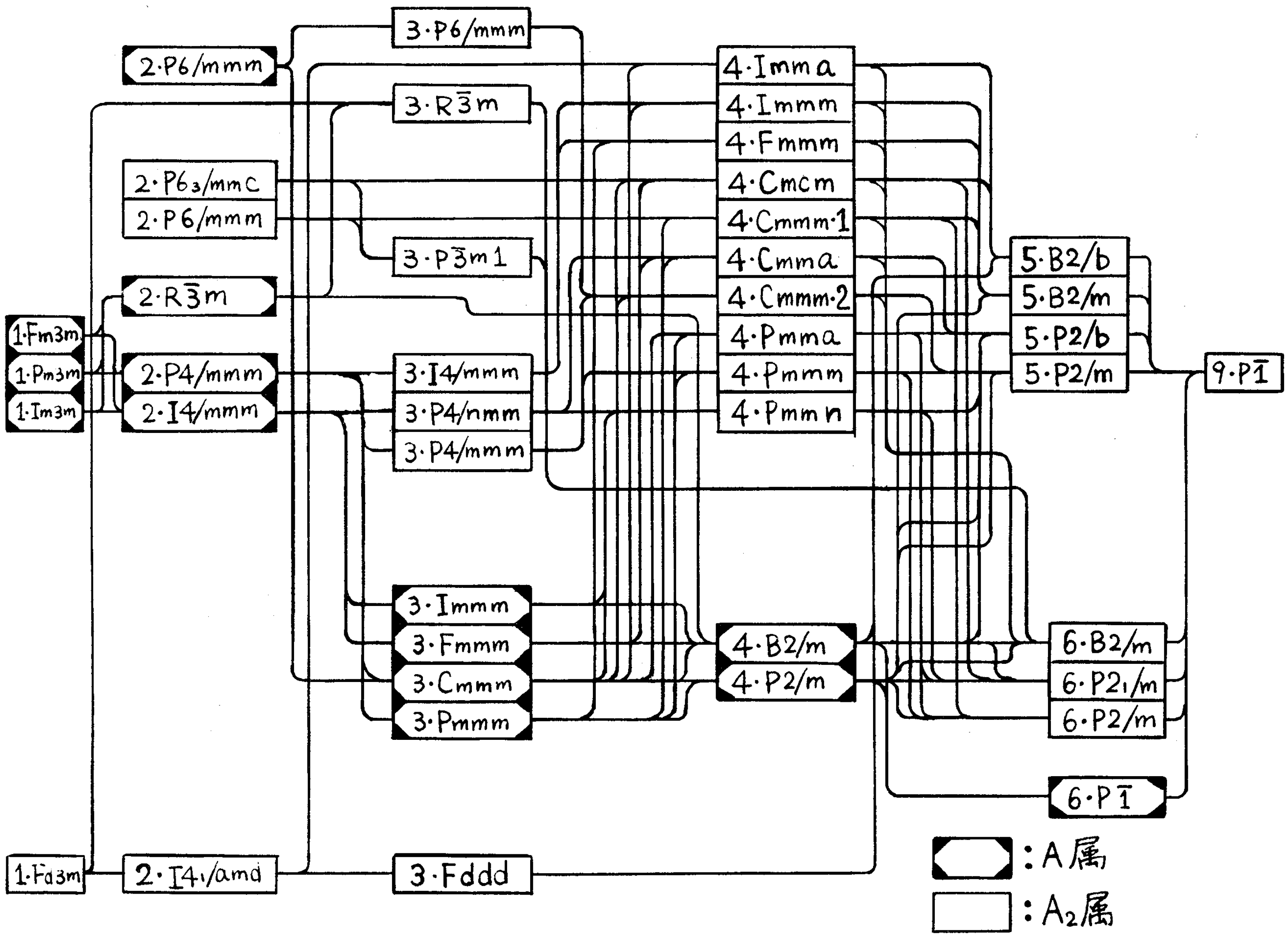


図 4. A属と A_2 属の接続階層図。線の枝分かれは丸みにそってのみ有効。

表　4.　結晶構造分類表の概要。

目	科	属	種
1	A	A	面心立方，体心立方，……………………………（ 14 種 ）
		A_2	ダイヤモンド、六方最密，…………………（ 29 種 ）
		⋮	
2	AB	AB	NaCl，CsCl，せん亜鉛鉱，………………（ 54 種 ）
		A_2B_2	ウルツ鉱，…………………………………………
		⋮	
3	AB_2	AB_2	螢石，………………………………………………
		A_2B_2	ルチル，……………………………………………
		⋮	
	ABC	ABC	
		$A_2B_2C_2$	
		⋮	
4	AB_3	AB_3	
		⋮	
	ABC_2	ABC_2	
		⋮	
	ABCD	ABCD	
		⋮	
5	A_2B_3	A_2B_3	
		⋮	
	AB_4	AB_4	
		⋮	
	⋮		
⋮			